tic function で表わされる。そしてその振巾の自乗に比例した単量体の歪と、振巾の自乗の1次微係数に比例した重心の歪とを伴つて、excess charge は移動する。

References

1) S. Yomosa: Biopolymer Symposia 1 (1964) 1;
J. Ladik and K. Appel: No. 78 (1962), Quantum Chemistry Group, Uppsala Univ.
2) H. Suzuki et al: J. Phys. Soc. Japan 19 (1964) 2175.
3) H. Suzuki et al: to be published.
4) H. Suzuki and J. Miyata: to be published in J. Phys. Soc. Japan 20 (1965).

非周期性の問題

松 田 博 嗣（京大理）

生体高分子がいくつかの unit から非周期的に構成されていることはその機能上重要な意義をもつと考えられる。この問題に対する一つの基礎として、等しい強さのバネで結ばれた非周期的な同位元素の振動子系について性質を紹介する。

第j番目の質点の平衡位置よりの変位を u_j とすると、運動方程式は

$$m_j \frac{d^2 u_j}{dt^2} = K(u_{j+1} - u_j) + K(u_{j-1} - u_j) \tag{1}$$

で与えられる。m_j はM又はM′とする（M′>M）。電子計算機による計算結果ではこれらの mass が random に配列している時の振動数スペクトルは非常に fine な構造をもつことがあるが、下記のような条件下では角振動数 ω に於てスペクトルは0になることが理論的に知られている。

$$\Delta M/M > Q(s, \lambda) = \cot\{\frac{1}{2}\theta(s, \lambda)\}\cot(\frac{\lambda}{2}) \quad , \tag{2}$$

$$\theta(s, \lambda) = \lim_{\varepsilon\to 0+} \operatorname*{Min}_{0\leq n\leq s} \{(n+1)\lambda - [\frac{n+1}{\pi}\lambda - \varepsilon]\pi\} , \tag{3}$$

$$\omega = \omega(\lambda) = 2\sqrt{K/M}\,\sin(\lambda/2) \quad , \quad \Delta M = M' - M \ . \tag{4}$$

ただし s は相続く mass M' の個数の最大値で、 $[\cdots]$ は Gauss 記号である。特に $\lambda = \frac{b}{a}\pi$ ($b < a$, a , b は互に素な整数) なるときは

$$Q(\infty, \lambda) = \cot(\frac{\pi}{2a})\cot(\frac{b\pi}{2a}) \geqq 2 \tag{5}$$

となり $\Delta M/M > Q(\infty, \lambda)$ ならば、M と M' の配列に無関係に spectral gap が出来る。

これに基準振動に関する Rayleigh の定理を用いると上のような gap $\omega(\lambda)$ における integrated spectrum を求めることが出来る。今 $N(\omega)$ を ω より高い振動数をもつ基準振動の fraction とすると、

$$N(\omega(\frac{n-k}{n}\pi)) = \frac{\sum_{J=0}^{\infty}[k(J+1)/n]P(J)}{\sum_{J=0}^{\infty}(J+1)P(J)} \tag{6}$$

ただし $P(J)$ は 2 コの M' にはさまれた相続く M の個数が J である確率である。特に mass の配列が単純マルコフ鎖をなすとき、任意の site が M で占められる確率を c ，或 site が M のときのそのとなりも M なる確率を α とすると

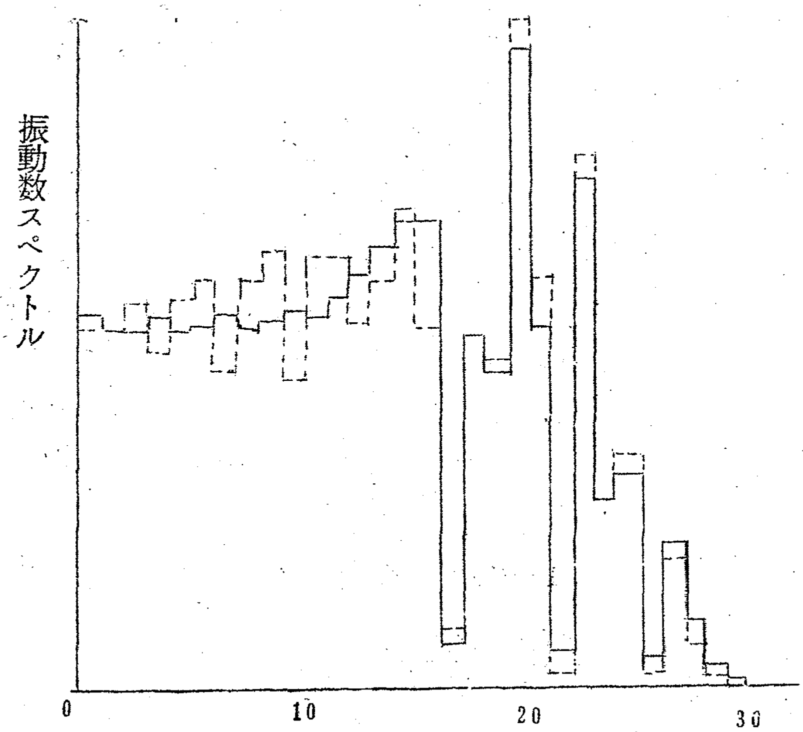
$$N(\omega(\frac{n-k}{n}\pi)) = \begin{cases} c(1-\alpha)\alpha^{n-2}/(1-\alpha^{n}) & (k=1) \\ \dfrac{c(1-\alpha)}{\alpha(1-\alpha^{n})}\sum_{S=1}^{k-1}\alpha^{[sn/k]} & (k\geq 2) \end{cases} \tag{7}$$

である。これはもちろん mass の配列に依存する量である。

配列を指定する量として、例えば相続く l コの site の mass が $m^{(1)}, m^{(2)}, \cdots, m^{(l)}$ なる確率 $f_l(m^{(1)}, m^{(2)}, \cdots, m^{(l)})$ が考えられる。系の性質を完全に specify するには十分大きい l の f_l が必要であるが、

$$(\alpha_j - E)G_{j,j'}(E) + \beta_j^{+}G_{j+1,j'}(E) + \beta_j^{-}G_{j-1,j'}(E) = \delta_{j',j'} \tag{8}$$

なるGreen 函数 $G_{j,j'}$(E) から導かれる巨視的物理量をEを中心とする巾ΓでLorentz 平均したものに対しては、Γに応じて"effective order length" $l(\Gamma)$があり、f_l, $(l>\Gamma(l))$ の影響は無視し得る。振動数スペクトルをΓなる振動数巾で平均化したものは正に上のような量であるので、Γによつては比較的short range order がスペクトルの大勢をきめていることになる。このことは与えられた f_l, $(l \sim l(\Gamma))$ と等しい f_l をもつように周期系のensemble を作り、そのspectrum のensemble average として非周期系のスペクトルを近似し得ることを示す。実際$\Gamma = W/32$ の場合(Wはband 巾) 8コのmass よりなるunit cell をもつ周期系のensemble average として図に示すようにrandom system のスペクトルがかなりよく近似し得ることが計算の結果知れる。この事実は非周期系の取り扱い上参考になると考えられる。



$$M'/M = 2$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\sin\left(\frac{\pi}{2}\cdot\frac{k}{32}\right)$$

——— 非周期鎖(1000コのmass)

- - - - 周期鎖の集団平均